**Руденский, Геннадий Евгеньевич.**

**Многочастичные потенциалы межатомного взаимодействия для сплавов простых, переходных и благородных металлов : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. - Томск, 1999. - 139 с.**

**Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Руденский, Геннадий Евгеньевич**

**Содержание**

**Введение**

**1. Методы моделирования межатомного взаимодействия**

**в металлах и сплавах**

**1.1. Первопринципные методы расчета термодинамических характеристик твердых тел**

**1.2. Квантовомеханически обоснованные модели**

**межатомного взаимодействия**

**1.3. Метод функционала электронной плотности**

**2. Метод модельного функционала**

**электронной плотности**

**2.1. Полная энергия металлов и сплавов в модели**

**функционала электронной плотности**

**2.2. Определение параметров модельного псевдопотенциала**

**2.3. Многочастичные потенциалы МФЭП**

**2.4. Область применимости модельного функционала**

**3. Методика и результаты расчета термодинамических**

**свойств сплавов**

**3.1. Расчет энергии образования сплавов N1 — А1 и Си — Аи**

**3.2. Расчет модулей упругости и фононных спектров**

**4. Уравнения состояния металлов и сплавов**

**4.1. Термодинамическая модель**

**4.2. Уравнения состояния металлов N1 и А1**

**- 34.3. Уравнения состояния сплавов И1А1 и N13А1**

**Заключение**

**Список литературы**